

## РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ВЯЗКОСТИ БИНАРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

*Морозова А. Д., Ефимов П. В.*

Харьковский национальный университет имени В.Н.Каразина

*pavel.v.efimov@univer.kharkov.ua*

Вязкость является одним из важнейших физико-химических свойств жидких систем. Широкое использование смешанных растворителей вызывает необходимость определять значения вязкости при различных составах и температурах. Пока не существует теории, которая с удовлетворительной точностью могла бы предсказывать значения коэффициента вязкости в зависимости от температуры и состава. Вместе с этим, существует ряд полуэмпирических теорий [1], которые довольно успешно описывают экспериментальные данные, используя относительно небольшое количество подгоночных параметров. На данный момент значения этих параметров не могут быть описаны на молекулярном уровне. Как правило, представление о молекулярных механизмах вязкости сводится к двум основным концепциям: концепции свободного объема (Бачинский) и концепции активационного движения (Аррениус, Френкель и др.). Зависимости вязкости могут быть выражены в виде двухпараметрических уравнений:

$$\text{Бачинского} \quad \eta = \frac{C}{V_M - b} \quad (1)$$

$$\text{Френкеля} \quad \eta = A \cdot \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \quad (2)$$

где  $C$ ,  $b$ ,  $A$  и  $E$  являются подгоночными параметрами, которые нетрудно определить методом наименьших квадратов из линеаризованных зависимостей (1) и (2) экспериментальных данных температурной зависимости вязкости и молярного объема [2].

Анализ полученных результатов показывает, что, например, полученные параметры  $A$  и  $E$  коррелируют между собой. Следовательно, для дальнейшего анализа возможно ограничиться только одним параметром ( $E$ ). Зависимости параметра  $E$  от состава бинарных смесей растворителей существенно неаддитивны. Используя уравнение Панченкова

$$E = E_1 X_1^2 + E_2 X_2^2 + 2E_{12} X_1 X_2 \quad (3)$$

для большинства систем рассчитаны значения параметра  $E_{12}$ . Проанализировано влияние природы растворителей на величины  $E$  и  $E_{12}$ .

Сделана попытка количественного описания этих параметров при помощи структурно-молекулярных дескрипторов.

[1] Панченков Г.М. Теория вязкости жидкостей. М: Гостоптехиздат, 1947, 156.

[2] Афанасьев В.Н., Ефремова Л.С. Волкова Т.В. Физико химические свойства бинарных растворителей. Иваново 1988.